

<https://helda.helsinki.fi>

---

## Uusi kemian tiedekasvatuksen tutkimushanke keminformatiikka kemian opetuksessa

Pernaa, Johannes

2021

---

Pernaa, J. & Aksela, M. 2021, 'Uusi kemian tiedekasvatuksen tutkimushanke keminformatiikka kemian opetuksessa', *Kemiauutiset KemiNyheter ChemistryNews*,  
Vuosikerta. 13, Nro 1, Sivut 61-63.

---

<http://hdl.handle.net/10138/330199>

---

unspecified

publishedVersion

---

*Downloaded from Helda, University of Helsinki institutional repository.*

*This is an electronic reprint of the original article.*

*This reprint may differ from the original in pagination and typographic detail.*

*Please cite the original version.*

# Uusi kemian tiedekasvatuksen tutkimushanke – KEMINFORMATIIKKA KEMIAN OPETUKSESSA

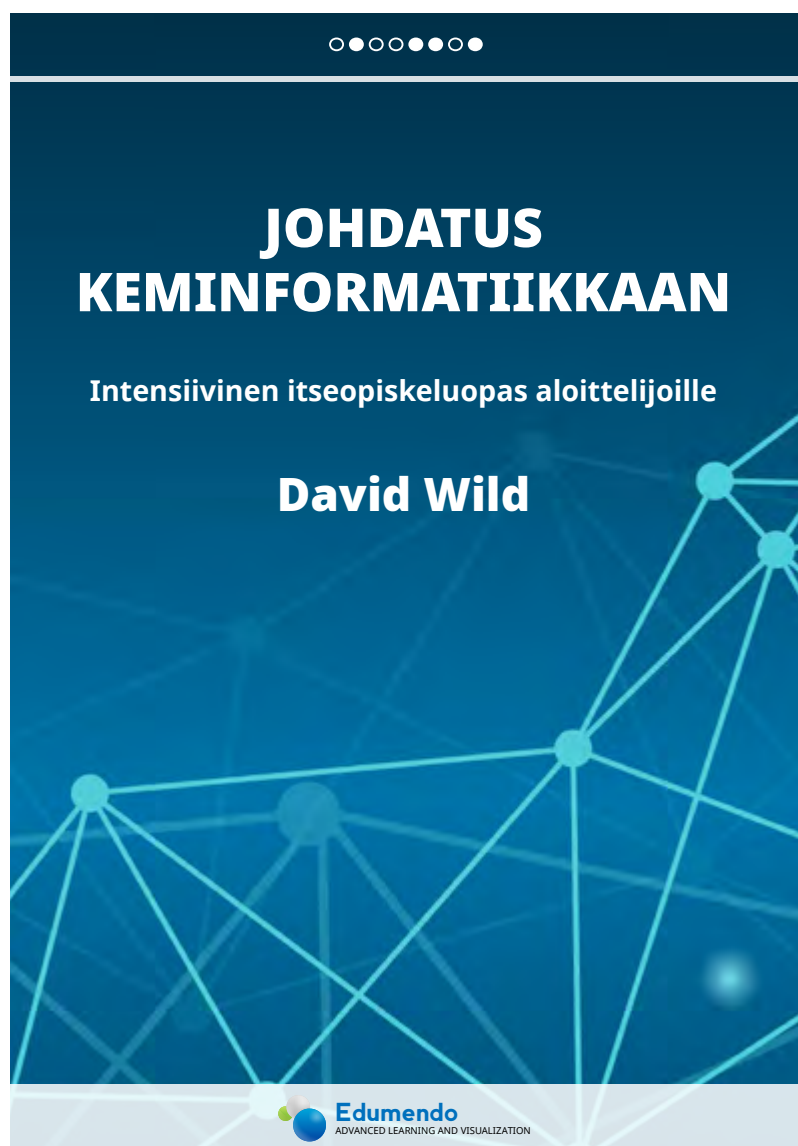
Monipuolinen yhteistyö tulee olemaan tutkimushankkeen perusta.

**K**emian tiedekasvatuksessa ja sen opettajankoulutuksessa tutkitaan ja kehitetään uusia ratkaisuja ja toimintamalleja kemian oppimisen tueksi. Tavoitteena on esitellä tulevaisuuden tekijöille kemian uusinta tutkimusta ja tieteen luonnetta heille relevanteilla tavoilla. Tässä hankkeessa uusia ratkaisuja kehitetään keminformatiikan kontekstissa. Keminformatiikka

on soveltavan kemian tutkimusala, jossa tutkitaan kaikenlaista tietokoneilla esitettävää kemiallista ja kemiaan liittyvää biologista informaatiota. Keminformatiikka tuottaa ratkaisuja kemian ohjelmistojen ja tietokantojen kehittämiseen. Näitä ohjelmistoja käytetään kaikessa kemian ja kemiaa hyödyntävien alojen tutkimuksessa ja opetuksessa.



Keminformatiikka on kemian tutkimusala, jossa tutkitaan kaikkea tietokoneilla esitettävää kemiallista ja kemiaan liittyvää biologista informaatiota.



Keminformatiikan historia juontaa 1950-luvulle, jolloin tietokoneita alettiin hyödyntämään tieteessä. Kemistit olivat tietokoneiden käytön edelläkävijöitä – 1950-luvulla kehitettiin tutkimuksen tueksi tilastomalleja ja 1960-luvulla ensimmäiset tietokoneavusteiset kemian visualisoinnit. Vaikka keminformatiikan tutkimusta on ollut muuhun kemian tutkimukseen integroituna jo lähes 70 vuoden ajan, pidetään keminformatiikkaa itsenäisenä tutkimusalanana nuorena. Alan määrittely ja rajaukset luotiin vasta 90-luvun lopussa.

Keminformatiikan tutkimus on poikkitieteellistä. Tutkimusryhmät voivat sisältää kemistejä, informaatikkoja, matemaatikkoja, tietojenkäsittelytieteilijöitä ja tilastotieteilijöitä. Yhteistyön kautta kehitetään muun muassa ohjelmistoja, sovelluksia, tietokantoja ja algoritmeja, joita voidaan hyödyntää kemiallisen informaation tallentamiseen ja tehokkaaseen hakemiseen. Esimerkiksi ajankohtaiset aiheet, kuten koneoppimisen ja tekoälyn hyödyntäminen kemian tutkimuksessa perustuvat keminformatiikkaan.

Poikkitieteellisyys asettaa haasteita myös keminformatiikan soveltamiselle kemian tiedekasvatuksessa – oppimateriaalien ja pedagogisten mallien kehittäminen edellyttää laajaa yhteistyötä eri alojen asiantuntijoiden kanssa. Yksikössämme on tästä yhteistyöstä pitkä kokemus. Maija Aksela aloitti aiheen tutkimisen vuonna 2001 (Maija Aksela & Lahtela-Kakkonen, 2001). Vuodesta 2002 lähtien yhteistyötä alettiin tehdä tutkija Jan Lundellin kanssa. Vuosituhannen alussa Aksela ja Lundell yhdistivät laskennallisen kemian ja kemian opetuksen tutkimuksen viimeisintä tutkimustietoa menestyksekkäästi. Tämä

Hankkeen tavoitteena on oppia ymmärtämään kemian ohjelmistojen, tietokantojen ja oppijoiden välistä vuorovaikutusta syvällisesti.

pioneerityö edisti opetukseen soveltuvaa tietokoneavusteista molekyylihallinnusta merkittävästi. Yhteistyöstä syntyi tieteellisten julkaisujen lisäksi oppimateriaaleja, verkkosivustoja ja kymmeniä opinnäytetöitä. (Ks. Aksela & Lundell, 2008.) Heidän tutkimuksensa myötä keminformatiikkaa on sovellettu Kemian opettajankoulutusyksikössä jo lähes 20 vuoden ajan, joten tilanne vastaa yleistä kemian alan kehitystä.

Kemian opettajankoulutusyksikössä uuteen tutkimusaiheeseen on tartuttu innolla. Lähestyimme aihetta perusteista aloittaen, josta osoituksena on ryhmämme viimeisin keminformatiikan julkaisu – alan suositun perusteoksen suomennos. Johdatus keminformatiikkaan -teos on vapaasti ladattavissa Helsingin yliopiston Helda Open Books -palvelusta (Wild, 2021). Teoksen suomennosprojektin aikana ymmärsimme, että emme ole keminformatiikassa suinkaan noviiseja. Ryhmällämme on pitkä historia avoimeen lähdekoodiin pohjautuvien kemian ohjelmistojen kehittämisessä (Pernaa, 2015; Pernaa & Aksela, 2011). Olimme tietämättämme työskennelleet suoraan keminformatiikan parissa jo vuosikymmenen verran. Työ ei ollut suunniteltua, koska emme tunteneet keminformatiikkaa käsitteensä.

Kokemuksesta on hyötyä. Aikaisemmat tutkimukset auttavat muun muassa tutkimusfokuksen rajaamisessa ja kohdennettujen yhteistyöverkostojen kokoaamisessa. Tämän hankkeen tavoitteena on vahvistaa aikaisempaa osaamista, ja suunnata jatkotutkimusta ohjelmistojen, tietokantojen ja oppijoiden välisen vuorovaikutuksen ymmärtämiseen. Fokuksemme on tietenkin kemian opetuksen ja oppimisen parantaminen, mutta tut-

kimustuloksia voidaan soveltaa laajasti minkä tahansa keminformaattisen systeemin ja käyttäjien välisen vuorovaikutuksen optimaaliseen kehittämiseen.

Monipuolinen yhteistyö tulee olemaan tutkimushankkeen perusta. Tavoitteena on verkostoitua sekä kansallisella että kansainvälisellä tasolla. Lähtökohdat ovat hyvät, sillä voimme luottaa kemian osaston ja laajemmin Kumpulan kampuksen tiedeyhteisön tukeen. Lisäksi SECO-tutkimusryhmämme on luonut 20 vuoden aikana professori Maija Akselan johdolla laajat kansainväliset verkostot.

Tällä hetkellä tutkimushanke on alkuvaiheessa. Rakennamme parhailaan yhteistyöverkostoja, jonka jälkeen haemme rahoitusta. Tutkimushankkeen etenemistä voi seurata TUHAT-portaalissa: <https://researchportal.helsinki.fi/projects/cheminformatics-in-science-education>.

#### **FT Johannes Pernaa**

Vastaava tutkija

#### **Prof. Maija Aksela**

SECO-tutkimusryhmän ja Kemian opettajankoulutusyksikön johtaja

#### **Lähteet**

- Aksela, M., & Lundell, J. (2008). Computer-based molecular modelling: Finnish school teachers' experiences and views. *Chemistry Education Research & Practice*, 9(4), 301–308. <https://doi.org/10.1039/B818464J>
- Aksela, Maija, & Lahtela-Kakkonen, M. (2001). Laskennallisen kemian mahdollisuuksia. *Dimensio*, 65(2), 34–37.
- Pernaa, J. (2015). Edumol: Avoin ja ilmainen molekyylihallinnusovellus kemian opetuksen tueksi. *LUMAT: International Journal on Math, Science and Technology Education*, 3(7), 960–975. <https://doi.org/10.31129/lumat.v3i7.977>
- Pernaa, J., & Aksela, M. (2011). Kehittämistutkimus: Kemian kouluopetukseen soveltuvan molekyylihallinnusympäristön kehittäminen. Teoksessa Maija Aksela, J. Pernaa, & M. Happonen (Toim.), *Kansainvälinen kemian vuosi: Kemia osaksi hyvää elämää* (ss. 110–121). Kemian opetuksen keskus, Kemian laitos, Helsingin yliopisto.
- Wild, D. (2021). *Johdatus keminformatiikkaan: Intensiivinen itseopiskeluopas aloittelijoille* (J. Pernaa, Käänt.). Edumendo. <https://doi.org/10.31885/9789529443918>